

强磁场下 $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ 的碰撞激发过程的态选择截面研究*

何斌^{1)†} 丁丁²⁾ 屈世显²⁾ 王建国¹⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所高能量密度物性数据中心, 北京 100088)

2) (陕西师范大学物理学与信息技术学院, 理论与计算物理研究所, 西安 710062)

(2012年10月7日收到; 2012年11月21日收到修改稿)

强磁场下的重粒子碰撞激发过程是重要的非弹性碰撞过程, 但相关研究还几乎是空白. 应用经典蒙特卡洛的方法在得到无磁场下 $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ 的碰撞激发截面的基础上, 详细研究了不同强度的纵向和横向强磁场环境下不同主量子数 n 和磁量子数 m 的碰撞激发过程的态选择截面. 同时用非微扰量子方法, 得到了强磁场下靶原子的能级, 并分析了其随磁场强度变化的原因. 对碰撞过程发现由于磁场的引入导致到不同 m 态的激发截面有较大的分离, 同时在较低入射能区的态选择截面变化行为与磁场方向有很大关系, 这与能级变化及横向强磁场所特有的抗磁项的相互竞争有密切联系. 通过对有关事例、径迹的分析, 解释了这些变化形成的原因. 也发现由于核的运动, 沿磁场方向的轨道角动量并非绝对守恒, 而有微小的变化.

关键词: 重粒子碰撞激发, 经典蒙特卡洛模拟, 强磁场, 态选择截面

PACS: 34.50.Fa, 34.50.-s

DOI: 10.7498/aps.62.073401

1 引言

重粒子碰撞广泛存在于自然界和实验室环境中, 这当中碰撞激发、电离和电荷转移是其中重要的非弹性碰撞过程^[1], 这些过程改变了电子能态, 在天体物理中通过研究电荷转移过程的末态电子发出的谱线, 来确定碰撞物质的丰度^[2]. 在多数情形下对它们的研究都限于无外场影响的孤立环境. 而真实的碰撞过程有许多是在有外场环境下进行的, 人们在研究中逐步发现外场环境往往对碰撞过程有强烈的影响, 因此在外场作用下的重粒子碰撞成为人们感兴趣的新的研究方向.

通常说来, 外场环境包括磁场^[3-9]、等离子体环境^[10-13]、外加静电场^[14]和激光场等^[15,16]. 人们发现对于在等离子体环境或外加静电场时, 碰撞截面会有明显改变^[7-10]; 对激光场下最近的重粒

子碰撞实验^[15]证实了早期的电荷转移过程会受到外加激光场强烈影响的理论预言^[16]. 这些外场不仅影响碰撞过程, 对原子结构也有强烈的影响, 如最近对德拜等离子体下的原子结构及谱线跃迁仍有研究^[17,18]. 在过去的几十年中, 作为外场之一的强磁场环境 ($B > 10^5$ T) 也受到了越来越多的关注, 这种强磁场广泛存在于天体中, 例如白矮星外部的磁场强度为 10^2 — 10^5 T, 中子星的磁场强度为 10^7 — 10^9 T. 这样强的磁场环境对天体物理中的原子结构和碰撞过程都会有很大的影响. 目前尽管在实验室条件下难以产生这样高强度的磁场, 但所能得到的几个特斯拉的磁场对处于高里德伯态的原子结构及碰撞过程也会有较大的影响^[4-6], 对相关碰撞过程的研究成了重粒子碰撞新的重要的研究方向^[3-9]. 在理论研究中通常磁场强度 (B) 是以参数 $\gamma = B/B_0$ 表示的, 其中 $B_0 = 2.3505 \times 10^5$ T 是一个原子单位的磁场强度.

* 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金 (批准号: 10976016) 和国家自然科学基金 (批准号: 11025417, 10974021, 10979007, 11104017) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: hebin-rc@163.com

在重粒子碰撞激发和电荷转移的理论研究中, 有好些不同的非微扰方法, 但总的说来主要分子量子力学方法, 如分子轨道强耦合 (MOCC)、原子轨道强耦合 (AOCC)、含时薛定谔方程的求解 (TDSE) 等, 以及经典力学方法, 如经典蒙特卡罗模拟 (CTMC). 这些方法各有优缺点, 如 MOCC 仅限于低入射能情形, AOCC^[12] 一般仅限于入射粒子的每核子动能从 1 到几百个 keV 的能量范围, TDSE^[19] 一般说来在较大的能区范围得到的结果都是可靠的, 但计算量很大. 同时量子方法主要用于外加纵向强磁场 (即入射粒子运动方向与磁场方向一致) 下电荷转移过程的研究, 如上世纪 80 年代有人用半经典的 AOCC 方法研究了中高入射能下 $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ 的碰撞过程, 发现不高于 25 keV/u 的入射能下由于磁场 ($\gamma \leq 0.2$) 的引入导致电荷转移的态选择截面有较大的分离^[7], 上世纪 90 年代有人用半经典的 MOCC^[8] 在一定的近似下研究了低入射能下的电荷转移过程. 而 CTMC^[20] 在每核子动能几个到上千个 keV 的范围内能得到可靠的结果, 对外加磁场下碰撞过程的研究, 它是一个很常用的理论方法. 使用 CTMC 方法, 在上世纪 80 年代^[3] 有人对入射粒子运动方向与磁场方向一致 (即纵向磁场情况) 且磁场强度 $\gamma \leq 0.2$ 情况下 $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ 的碰撞过程进行了最初的研究, 但当时计算中所取的事例数较少; 随后在上世纪 90 年代和本世纪初^[4-6] Lutz 等人开展了纵向磁场对离子与高里德伯态原子等电荷转移过程的态选择截面及电离过程影响的深入研究. 近年来我们分别对纵向和横向磁场 (磁场方向与入射粒子运动方向垂直) 下 ($\gamma \leq 0.2$) 的 $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ 碰撞过程进行了较为细致的研究^[9], 发现在低入射能时 (如 25 keV/u) 与横向磁场有关的抗磁项会引起碰撞激发和电离截面的明显增加, 伴随着电荷转移截面的下降, 而随着入射能的增加 (如 100 keV/u 以上), 这种行为渐渐消失. 在我们最近的工作^[21] 中对有关的碰撞电离的微分截面进行了较为详细的研究. 总的说来在磁场下重粒子碰撞过程的研究主要限于电荷转移过程, 对碰撞激发的研究还很少.

由于磁场的存在大大增加了碰撞过程的复杂性, 这很可能引起碰撞激发的截面, 特别是到不同主量子数 n 和磁量子数 m 的态选择截面与没有磁场时有很大差别, 而且它们也受磁场的大小和方向以及入射粒子能量等因素的影响而变化, 目前为止对这方面的认识还是很不完全的, 特别是碰撞

激发的态选择截面未见研究, 而这是重要的碰撞过程. 在本文中我们拟对不同磁场条件下有代表性的 25 keV/u 和 100 keV/u 的入射能下碰撞激发过程的态选择截面进行较为详细的讨论, 我们将会发现有关结果在不同条件下会发生较为复杂的变化; 此外由于强磁场的存在会改变有关的原子能级, 特别是高激发态的能级值, 它们会直接影响有关的态选择截面, 因此我们还必须同时得到这些能级值.

在本文中, 若无特殊说明, 采用的都是原子单位.

2 经典蒙特卡罗模拟方法简介

在均匀磁场下, 对所研究的碰撞过程电子的哈密顿量可以写为

$$H = \frac{1}{2}\nu^2 - \frac{1}{R_{\text{et}}} - \frac{2}{R_{\text{ep}}} + \frac{1}{2}\gamma_{\alpha}L_{\alpha} + \frac{1}{8}\gamma_{\alpha}^2\rho_{\alpha}^2, \quad (1)$$

其中 ν 为电子速度, R_{et} 和 R_{ep} 是电子和入射粒子相对于靶核和入射粒子的距离, $\alpha = z$ 和 x 分别表示纵向和横向磁场, L_{α} 表示沿磁场方向的电子轨道角动量 (忽略自旋), $\rho_z^2 = x^2 + y^2$ 及 $\rho_x^2 = z^2 + y^2$, x, y, z 为电子的空间坐标. 入射粒子的入射速度被定义为沿 z 方向; $\frac{1}{2}\gamma_{\alpha}L_{\alpha}$ 和 $\frac{1}{8}\gamma_{\alpha}^2\rho_{\alpha}^2$ 分别为顺磁项和抗磁项, 而抗磁项在纵向和横向磁场分别为 $\frac{1}{8}\gamma_z^2(x^2 + y^2)$ 和 $\frac{1}{8}\gamma_x^2(z^2 + y^2)$, 很明显, 对横向磁场, 在碰撞过程中如果电子要随入射粒子一起沿 z 方向运动, 其抗磁项会随着 z 的增加而越来越强. 对氢原子体系, 假定原子核不动且固定在空间坐标原点时, L_{α} 具体表示为 $L_{\alpha} = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_{\alpha} = [\mathbf{r} \times (\boldsymbol{\nu} - \mathbf{A})]_{\alpha} = [\mathbf{r} \times (\boldsymbol{\nu} - \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r})]_{\alpha}$, 其中 \mathbf{p} 为电子的正则动量, \mathbf{A} 为矢势, \mathbf{r} 为电子的空间坐标^[5]. 考虑核的运动时, 磁场下的两体问题不再能将相对运动与质心运动区分开^[22], 电子相对于核的 L_{α} 不再守恒, 但考虑到靶核的运动非常慢, 且靶核与电子的质量相差巨大, 电子相对于核的 L_{α} 是近似守恒的, 此时 L_{α} 表达式中的 \mathbf{r} 和 $\boldsymbol{\nu}_e$ 应分别为电子相对于靶核的空间位置和速度, 后面我们还将给出此时 L_{α} 近似守恒的简单证明.

根据氢原子的基态能量, 利用微正则分布可以获得靶电子的初始坐标和动量^[20], 然后再利用迭代方法求解三体系统的经典运动方程. 在求解运动方程后, 根据末态电子相对于靶核和入射粒子的能量 (分别用 E_{et} 和 E_{ep} 表示) 值判断是何种过程, 对碰撞激发要求 $E_{\text{et}} < 0$ 同时 $E_{\text{ep}} > 0$, 反之为电荷转移

过程. 这里 E_{et} 和 E_{ep} 分别为 $E_{et} = \frac{1}{2}(\nu_e - \nu_t)^2 - \frac{1}{R_{et}}$ 和 $E_{ep} = \frac{1}{2}(\nu_e - \nu_p)^2 - \frac{2}{R_{ep}}$, ν_e , ν_t 和 ν_p 分别为电子、靶核以及入射粒子的速度矢量.

这里需要说明的是由于在我们涉及的最大磁场强度下 ($\gamma \leq 0.2$), 氢原子基态的能级和波函数的变化都很小, 因此对 CTMC 中初态电子的产生我们仍然可以沿用原有的处理方法 [20]. 在计算过程中, 我们选择的最大碰撞参数为 $b_{max} = 7.5$ 和径迹数为 2×10^7 以保证计算的收敛性. 对所研究过程的截面我们采用 $\sigma = \frac{N_{event}}{N_{total}} \pi b_{max}^2$ 进行计算, 其中 N_{event} 是所计算过程的事例数, N_{total} 为某个入射能下的总径迹数. 同时我们对每条径迹的演化都计算了足够长

的时间以使得末态的入射离子和靶核的距离足够远, 尽量消除库仑势对末态电子能量的影响而保证结果的可靠性.

3 强磁场环境下氢原子的能级结构

由于强磁场的存在, 原来简并的氢原子能级会分裂, 相应的波函数也会发生重大变化, 要自洽地得到较为可靠的碰撞激发态选择截面, 必须参考这些新的能级值. 为此我们采用非微扰的全量子的方法计算这些能级值, 对所用方法参考文献 [23] 有详细介绍, 这里我们不再重复, 表 1 给出了强磁场环境下氢原子的能级值的详细结果.

表 1 在强磁场环境下氢原子的能级值

nlm	γ	0	0.05	0.1	0.15	0.2
1s		-0.5	-0.499377	-0.497526	-0.494503	-0.490382
2s		-0.125	-0.117017	-0.098089	-0.074331	-0.048987
2p ₀		-0.125	-0.121465	-0.112410	-0.099911	-0.085184
2p ₋₁		-0.125	-0.143058	-0.150846	-0.152608	-0.150539
2p ₊₁		-0.125	-0.093058	-0.050846	-0.002608	
3s		-0.056	-0.024706	-0.024938		
3p ₀		-0.056	-0.041380	-0.019892		
3p ₋₁		-0.056	-0.051258	-0.031171	-0.011190	
3p ₊₁		-0.056	-0.001258			
3d ₀		-0.056	-0.045489	-0.024938		
3d ₋₁		-0.056	-0.064120	-0.057812	-0.046196	-0.031785
3d ₋₂		-0.056	-0.081889	-0.087840	-0.086543	-0.081321
3d ₊₁		-0.056	-0.014120			

此时给出的能级结果为减去了朗道能级后的值, 计算综合考虑了顺磁项和抗磁项的影响. 表的第一列给出了这些能级的标识 (n, l, m), 但并不意味着此时 l (对应于电子轨道角动量的量子数) 是好量子数, 仅表示这能级的波函数用无外场的氢原子波函数作为基矢展开时, 这个 n, l, m 对应的态所占的份额最大. 作为比较, 表的第二列给出了无磁场时的能级值. 表格中能级值为空的部分意味着所对应的能态属于连续电子, 即其能级值为正. 比较有、无磁场时的结果, 所有 $m = 0$ 所对应的能级值上升了, 显然这是 (1) 式中的抗磁项 (它总为正) 所起的作用, 而 $m < 0$ 所对应的能级值与 $m = 0$ 的相比被压低, 这是顺磁项和抗磁项共同作用的结果, 特别是 $m < 0$ 所对应的能级值随磁场的变化趋势并非

是单调下降的, 这是顺磁项和抗磁项共同竞争的结果. 下面我们将在此基础上研究碰撞激发的总截面和态选择截面.

4 碰撞激发的总截面和态选择截面

用 CTMC 的方法研究类似 $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ 的入射能从几个 keV/u 到几百个 keV/u 的碰撞过程有关截面, 自从 Olson 等人的有关工作 [24] 已有较长的历史, 并已取得与实验符合的结果, 但其中碰撞激发过程的截面据我们所知却并不太好, 比实验结果和更可靠的强耦合的量子方法得到的结果 [25] 低近 50% (后面将给出具体的有关结果). 由于 CTMC 属于经典力学的计算, 处于激发态电子的能量是

连续变化的, 而真实的束缚态电子能量是量子化的, 由此需要有一个标准来判断处于什么能量范围的电子对应于量子力学的哪个能级的电子, 近 30 年前 Becker 等人 [26] 对类氢离子激发态体系假定满足经典的微正则分布给出了这样一个判据, 即 $[(n-0.5)(n-1)n]^{1/3} < n_c \leq [(n+0.5)(n+1)n]^{1/3}$, $E = -\frac{Z^2}{n_c^2}$, 这里 Z 是核电荷数, E 是电子的经典能量, 由此对被碰撞激发的氢原子, 其末态电子能量 E_{exc} 至少为 -0.24 , 在通常的 CTMC 计算中大都采用这个判据. 这判据对电荷转移过程往往能给出不错的结果, 但对碰撞激发却不够好. 为了使我们在强磁场下的有关结果可靠, 首先我们应使无磁场时的结果尽量可靠, 为此必须改进 CTMC 的方法中对激发事例的能量判据. 为此对处于氢原子激发态上的电子, 我们取其最低能量不低于 $0.5[E(1s) + E(2s)]$, 这里 $E(1s)$ 和 $E(2s)$ 分别表示氢原子 1s 态和 2s 态的能级值, 由此对于无磁场下的氢原子, 此最低能量值为 -0.317 . 图 1 给出了不同判据下 CTMC 方法得到的有关碰撞激发总截面值, 并和更可靠的强耦合量子方法的结果 [26] 进行了比对 (Winter 的结果在图中显示的入射能范围与实验值很接近 [26]). 可以看出利用新的能量判据给出的 CTMC 结果 (用图中的黑线表示) 更接近强耦合量子方法的结果 (见图中的实圈), 特别是在入射能为 25 keV/u 和 100 keV/u 附近, 而根据旧的判据得到的结果 (见图中的空圈) 约为量子方法的 1/2, 它和早期 Olson 用同样的旧判据得到的结果 [24] 是一致的 (其结果在图中未显示). 这表明对处于碰撞激发态的电子不一定都能满足经典的微正则分布. 下面我们将根据能量判据的新标准计算 25 keV/u 和 100 keV/u 时有磁场存在下的态选择截面.

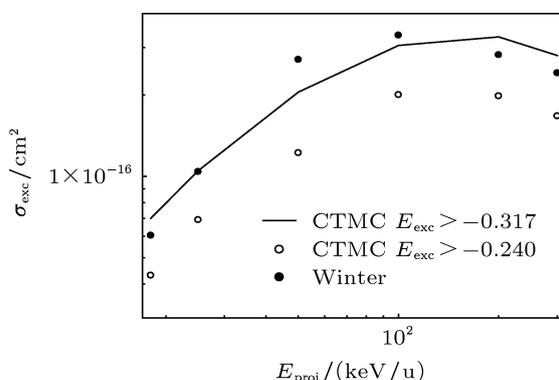


图 1 碰撞激发总截面随入射能变化的结果

表 2 和表 3 分别给出了入射能为 25 keV/u 和

100 keV/u 时不同强度的纵向、横向磁场包括无磁场时主要的碰撞激发过程的态选择截面值, 对 $n=3$ 的末态我们只给出到其最低能态 $3d_{-2}$ 的截面值, 是因为我们发现到其别的能态的截面值低了一个量级以上. 表 2 中的空格部分表示此截面值很小, 几乎为 0. 由于这些截面值同时与末态电子能量 E_{et} 和沿磁场方向的轨道角动量 L_α 有关, 而在经典模拟中这些量都是连续变化的, 就必须对 E_{et} 和 L_α 同时作一些限制, 这里有必要对模拟中所用的判据作具体说明: 1) L_α 是近似守恒的, 为将它对应于磁量子数 m , 我们把满足 $m-0.5 < L_\alpha \leq m+0.5$ 条件的事例定为属于 m 的量子态; 2) 由于电子轨道角动量 l 不是好量子数, 而且 $2s, 2p_0$ 的 m 相同而且能级又较为靠近, 经典模拟难于区分这两个态, 所以在表中给出了它们总的态选择截面; 3) 在 $n=2$ 的末态中 $2p_-$ 是最低能态, 对激发到此能态的电子能量下限 $E_{min}(2p_-)$ 我们要求不低于 $0.5[E(1s) + E(2p_-)]$, 而在 $n=3, m=-1$ 的末态中 $3d_-$ 是最低能态, 对激发到 $2p_-$ 能态电子的能量上限 $E_{max}(2p_-)$ 我们要求不高于 $0.5[E(2p_-) + E(3d_-)]$; 4) 从表 1 看 $2s, 2p_0$ 能级值在有磁场时明显比 $2p_-$ 的高 (对高出的这部分统一用 ΔE 表示), 对它们的经典能量下限我们要求不低于 $E_{min}(2p_-) + \Delta E$, 能量上限我们取为其 $n=2, m=0$ 的最高能级与其 $n=3$, 同一 m 的最低能级的平均值, 如果其 $n=3$, 同一 m 的最低能级为连续态, 我们取此最低能级值为 0; 5) 对 $2p_+$ 和 $3d_{-2}$ 其能级值一般说来比 $2p_-$ 的高出不少, 对激发到这些态的电子我们要求其能量介于其能级值的 2 倍与 0.5 倍之间, 而当磁场强度为 0.2 的 $2p_+$ 已为连续态, 就不可能激发到此态, 所以对此末态未给出相应的态选择截面值.

表 1 和表 2 给出的态选择截面值有一些共同点: 1) $2s, 2p_0$ 的总截面值是最大的, 我们认为这是由于它包含了两个重要的态而其他的都只是一个态; 2) 无磁场时 $2p_-$ 和 $2p_+$ 的截面值是没有分离的, 此时它们的能级值也是相同的, 但随着强磁场的引入, 它们出现了严重的分离: 到 $2p_-$ 的截面值随磁场强度的增加而显著增加, 而到 $2p_+$ 的截面值迅速减小. 显然这一方面与我们所研究的磁场强度范围内 $2p_-$ 的能级被压低而 $2p_+$ 的却迅速抬高有关, 另一方面与 L_α 的表达式有关. 以纵向磁场为例, 它为 $L_z = xv_y - yv_x - 0.5\gamma_z^2(x^2 + y^2)$, 这里 x 和 v_y 等均为电子相对于靶核的位置和速度的分量, 并取矢势 $A_x = -0.5y\gamma_z$ 和 $A_y = -0.5x\gamma_z$, 很明显

磁场的存在有助于减小 L_α 的值, 使得到 $m = -1$ 末态的电子会增加, 而到 $m = +1$ 的会减少. 可以预计如果磁场强度变得特别大, 以致于 $m = -1$ 的能级值也被大大抬高, 甚至成为连续态, 到它的激

发截面值也会迅速下降; 3) 到 $3d_{-2}$ 的截面随磁场强度的增加而明显增加, 其原因与 $2p_{-}$ 的应该类似, 但由于其能级值较高, 其截面比到 $2p_{-}$ 的低了不少.

表 2 25 keV/u 时不同磁场下氢原子的碰撞激发态选择截面 (单位: 10^{-18}cm^2)

γ nlm	无磁场	纵向磁场				横向磁场			
	0	0.05	0.10	0.15	0.20	0.05	0.10	0.15	0.20
2s,2p ₀	60.0	57.7	57.0	53.6	52.7	50.7	51.7	60.3	71.1
2p ₋	14.0	14.3	16.5	20.0	30.0	16.7	26.3	36.6	46.5
2p ₊	14.0	6.0	1.0	0.02	0.00	7.8	2.5	0.02	0.00
3d ₋₂					0.25	0.13	3.2	8.6	12.8

表 3 100 keV/u 时不同磁场下氢原子的碰撞激发态选择截面 (单位: 10^{-18}cm^2)

γ nlm	无磁场	纵向磁场				横向磁场			
	0	0.05	0.10	0.15	0.20	0.05	0.10	0.15	0.20
2s,2p ₀	139	128	123	118	104	130	122	121	105
2p ₋	53.5	64.2	75.2	89.5	99	56.8	63.4	72.5	81.5
2p ₊	53.5	20.5	9.45	0.41	0.00	25.6	12.4	0.65	0.00
3d ₋₂	0.12	0.53	1.18	1.87	4.20	0.4	1.16	2.25	4.23

比较表 1 和表 2, 也能看到不同入射能、不同磁场方向时截面变化的一些差别: 1) 无磁场时 100 keV/u 时的激发总截面 (近似为这些态选择截面之和) 比 25 keV/u 时的要大一倍以上, 这导致加入磁场后相应的激发总截面在 100 keV/u 时仍比 25 keV/u 的要大不少. 2) 在 25 keV/u 和横向磁场下, 总截面起初随磁场强度的增加而减小, 但随着磁场强度的进一步增加, 激发总截面明显增加, 到磁场强度为 0.2 时已由无磁场时的 $0.88 \times 10^{-16} \text{cm}^2$ 增加为 $1.3 \times 10^{-16} \text{cm}^2$, 我们认为这种变化是两种因素互相竞争的结果, 一是强磁场下 2s 和 2p₀ 的能级被迅速抬高, 使得到这些激发态更困难, 二是横向磁场特有抗磁项 $\frac{1}{8}\gamma_x^2(y^2 + z^2)$, 它导致激发截面的增加. 抗磁项导致激发截面的增加有一个简单的解释: 它的存在使得电子要被入射粒子俘获, 必须越过很高的势垒, 同时势垒的高度随着磁场的增强而增加 (与 γ_x^2 成正比), 由此只有那些被入射粒子束缚得很深的电子才会跃过这势垒, 部分电子跃不过去, 这使得在横向磁场较强时好些本该被俘获的电子变成了被激发或被电离的电子, 这导致俘获截面的明显下降, 同时伴随着电离和激发截面的明显增强. 3) 除上述 25 keV/u 及横向强磁场下激发总截面比无磁场时要大之外, 其余的均是随着磁场的

增强而减小, 我们认为有两大原因, 一是在纵向磁场下没有导致激发截面增加的抗磁项, 同时多数激发态的能级值随着磁场的增强而抬高, 减少了到这些态的截面; 二是在 100 keV/u 及横向磁场下抗磁项对激发截面的增加几乎不起作用, 这是因为尽管存在抗磁项, 但此入射能下无磁场时电子俘获截面本来就很小 [9], 这意味着在引入磁场后, 没有那么多的电子能成为转化为被电离或激发的电子, 这导致电离和激发截面的增加越来越缓慢. 总的说来影响截面的因素只剩下前面所说的能级值的抬高, 导致最终激发总截面的减少; 4) 25 keV/u 时在横向磁场下, 到 2p₋ 和 3d₋₂ 的截面随磁场强度增长得最快, 尤其是到 3d₋₂ 的截面, 我们认为与这上面所述第二点的原因有关: 横向磁场阻碍了电子的俘获, 使其一部分成为被激发的电子, 在这过程中一些电子先被入射粒子吸引而沿入射粒子前进的 z 方向运动, 导致其坐标空间的 z 分量增加, 后来在横向磁场作用下不再与入射粒子一起运动, 其坐标空间的 z 分量不再增加, 但同时其 y 分量在增加, 最后其 $y^2 + z^2$ 保持较大, 而其 y, z 分量交替变化, 由此 $-0.5\gamma_x^2(z^2 + y^2)$ 成为一个绝对值较大的负数, 导致到 $L_x \leq -1$ 的末态激发电子大量增加, 而形成我们所看到的结果. 下面的径迹图显示了这种演化过程.

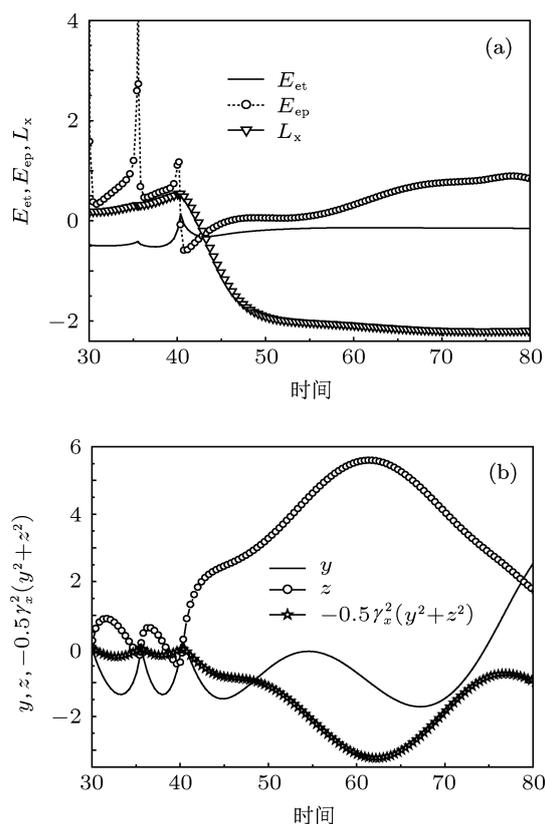

 图2 (a), (b) 在 25 keV/u 和 $\gamma_x = 0.2$ 时的某个电子径迹图

图 2(a), (b) 给出了在 25 keV/u 和横向磁场 $\gamma_x = 0.2$ 时某个典型的电子径迹图, 图 2(a) 显示的是电子相对于靶核的能量 E_{et} 和 L_x 以及它相对于入射粒子的能量 E_{ep} 三者随时间的演化曲线, 这图清晰表明较早时刻电子几乎处于基态附近, 随着入射粒子的到来, E_{et} 和 E_{ep} 在逐渐发生变化, 在时刻 40.0 附近 (此时入射粒子距电子最近, 这在图中未显示出来), 在入射粒子的作用下电子暂时被俘获, 即电子相对于靶核成为自由态 ($E_{et} > 0$), 但同时也是入射粒子的束缚态 ($E_{ep} < 0$), 在随后的一段时间里 ($40 \leq t \leq 45$) 保持 $E_{ep} < 0$, 随着时间的推移在横向磁场的作用下 $E_{ep} > 0$, 电子离开了入射粒子, 变成了处于靶核激发态的束缚电子, 最后入射粒子远离它们, E_{et} 几乎不再变化, L_x 也几乎保持小于 -2.0 . 图 2(b) 显示的是同一径迹中电子相对于靶核的空间位置分量 y, z 及 L_x 中与磁场有关部分 $-0.5\gamma_x^2(z^2 + y^2)$ 随时间的演化曲线, 它显示在 $E_{ep} < 0$ 这段时间里, 电子被入射粒子吸引着沿 z 方向运动一段时间, 它的 z 为正值, 且在迅速增加, 同时 $0.5\gamma_x^2(z^2 + y^2)$ 也在迅速增加, 后来在横向磁场作用下, 电子沿 y, z 方向的运动在交替转换, $-0.5\gamma_x^2(z^2 + y^2)$ 几乎保持小于 -1 . 这里尽管给出

的是一个径迹图, 我们也对所有的激发事例做了统计, 仅在横向磁场和较低入射能 (如 25 keV/u) 时才有明显的电子曾被入射粒子俘获过的情形, 当 $\gamma_x = 0.2$ 时这种情形占有所有激发事例的 35%, 而在无磁场时它几乎为 0, 而出现这种情形的电子绝大多数都成了到 $L_x \leq -1$ 的激发态电子.

此外我们跟踪有磁场时激发电子的 L_α 随时间演化的径迹, 发现当入射粒子经过碰撞并远离靶核后, L_α 有些微小的振荡, 并非绝对守恒, 而如果固定靶核的位置, 不允许其运动时, L_α 的守恒满足得很好. 这点以纵向磁场为例, 在忽略入射粒子的影响下可以证明 $\frac{dL_z}{dt} = \frac{\gamma_z}{M}(xv_{ix} + yv_{iy})$, 这里 M 为靶核质量, v_{ix} 和 v_{iy} 为靶核运动速度分量, 可见考虑靶核的运动后 L_α 并不严格守恒, 但由于其质量比电子大许多, L_α 是近似守恒的.

另外需要说明的是我们所得到的态选择截面在一定程度上依赖于对末态电子能量的判据, 而在经典的计算中, 要给出准确的能量判据是很困难的, 更精确的结果有赖于量子力学方法的计算, 这是我们下一步的工作, 但经典方法能给出可靠的变化行为, 并能从中得到对里面的物理机理较深入的认识, 这是我们目前工作的意义.

5 结论

总的说来我们在应用 CTMC 方法得到无磁场下 $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ 的碰撞激发和电荷转移过程有关截面的基础上, 详细研究了在不同强度的纵向和横向强磁场环境下到不同主量子数和磁量子数的碰撞激发过程的态选择截面. 同时用非微扰量子方法, 得到了强磁场下有关原子的能级, 发现所有磁量子数 $m \geq 0$ 所对应的能级值被迅速抬高, 而 $m < 0$ 所对应的能级值随磁场的变化趋势并非是单调下降的, 这是顺磁项和抗磁项共同竞争的结果. 尽管无磁场时 $2p_-$ 和 $2p_+$ 的截面值是没有分离的, 但在强磁场作用下到 $2p_-$ 的截面值随磁场强度的增加而显著增加, 而到 $2p_+$ 的截面值迅速减少, 这与能级值的相应变化有重要关系. 同时在较低入射能的态选择截面随磁场强度的变化行为与磁场方向有很大关系, 此时横向磁场的存在使得一部分本该被俘获的电子转换为被激发的电子导致在磁场很强时激发的总截面有明显的增加, 并且到 $m < 0$ 的态选择截面也在迅速增加. 通过对有关事例、径迹的分析, 解释了这些变化形成的原因. 也发现在不同入

射能和纵向磁场以及高入射能和横向磁场的情形下, 激发的总截面由于多数能级的抬高而降低. 也看到由于核的运动, 这些电子沿磁场方向的轨道角

动量并非绝对守恒, 而是有微小的变化.

作者感谢曾思良同志提供计算强磁场下氢原子能级结构的程序.

-
- [1] Drake Gordon W F (Ed.) 2006 *Handbook of atom, molecular, and optical physics* (Heidelberg: Springer-Verlag Press)
- [2] Haberli R M, Gombosi T I, De Zeeuw D L 1997 *Science* **276** 939
- [3] Grosdanov T P, McDowell M R C 1985 *J. Phys.* B **18** 921
- [4] Bradenbrink S, Sidky E Y, Roller-Lutz Z, Lutz H O 1997 *J. Phys.* B **30** L161
- [5] Bradenbrink S, Sidky E Y, Roller-Lutz Z, Reihl H, Lutz H O 1997 *Phys. Rev. A* **55** 4290
- [6] Bradenbrink S, Reihl H, Roller-Lutz Z, Lutz H O 1997 *J. Phys.* B **30** 5819
- [7] Bivona S, McDowell M R C 1987 *J. Phys.* B **20** 1541
- [8] Suzuki S, Shimakura N, Kimura M 1996 *J. Phys.* B **29** 1063
- [9] He B, Wang J G, Janev R K 2009 *Phys. Rev. A* **79** 012706
- [10] Zhang H, Wang J G, He B, Qiu Y B, Janev R K 2007 *Phys. Plasmas* **14** 053505
- [11] Pandey M K, Lin Y C, Ho Y K 2012 *Phys. Plasmas* **19** 062104
- [12] Liu L, Wang J G, Janev R K 2008 *Phys. Rev. A* **77** 042712
- [13] Ding D, He B, Liu L, Zhang C H, Wang J G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8419 (in Chinese) [丁丁, 何斌, 刘玲, 张程华, 王建国 2009 物理学报 **58** 8419]
- [14] Luka S, Fabio S 1997 *J. Phys.* B **29** 751
- [15] Lu Z Z, Chen D Y, Fan R W, Xia Y Q 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 014105
- [16] Tom Kirchner 2004 *Phys. Rev. A* **69** 063412
- [17] Ning L N, Qi Y Y 2012 *Chin. Phys. B* **21** 123201
- [18] Xie L Y, Wang J G, Janev R K, Qu Y Z, Dong C Z 2012 *Eur. J. Phys. D* **66** 125
- [19] Pinzola M S, Lee T G, Colgan J 2011 *J. Phys.* B **44** 205204
- [20] Abrines R, Percival I C 1966 *Proc. Phys. Soc. London* **88** 861
- [21] Ding D, He B, Qu S X, Wang J G 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 033401 (in Chinese) [丁丁, 何斌, 屈世显, 王建国 2013 物理学报 **62** 033401]
- [22] Friedrich H 1998 *Theoretical atomic physics* (Heidelberg: Springer-Verlag Press)
- [23] Ning F F, He J F, Zeng S L, Zou S Y, Yan J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 043201 (in Chinese) [倪飞飞, 何建锋, 曾思良, 邹士阳, 颜君 2011 物理学报 **60** 043201]
- [24] Reinhold C O, Olson R E, Fritsch W 1990 *Phys. Rev. A* **41** 4837
- [25] Winter T G 2007 *Phys. Rev. A* **76** 026702
- [26] Becker R L, MacKellar A D 1984 *J. Phys.* B **17** 3923

Investigation of state-selective cross-sections for excitation processes of the collisions of $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s)$ in strong magnetic fields*

He Bin^{1)†} Ding Ding²⁾ Qu Shi-Xian²⁾ Wang Jian-Guo¹⁾

1) (Data Center for High Energy Density Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

2) (Institute of theoretical & computational physics, school of physics and information technology, Shanxi Normal University, Xi'an 710062, China)

(Received 7 October 2012; revised manuscript received 21 November 2012)

Abstract

Based on the excitation cross-sections in collisions of $\text{H}(1s)$ atoms with He^{2+} obtained by using the classical trajectory Monte Carlo method, the state-selective cross-sections of excitation processes for different n and m , where n and m are the principal and magnetic quantum numbers respectively, are studied with the application of strong longitudinal and transverse magnetic fields. Meanwhile, the precise energy levels for atom H in strong magnetic fields are obtained by non-perturbative quantum method. It is found that there is some strong separation of the state-selective cross-sections among different magnetic quantum states. Such behaviors are related to the variation of the energy levels and the diamagnetic terms induced by the applied magnetic fields. The diamagnetic terms in transverse magnetic fields result in the rapid increase of the cross-sections for the state of negative m at 25keV/u , which is further indicated by the trajectory in this case. In some cases the decrease of the total excitation cross-sections is found to be due to the rise of the energy levels caused by the magnetic fields. The orbital angular momentum along the direction of the magnetic field is not conserved absolutely; this phenomenon is found also in the trajectories and agrees with our analysis.

Keywords: impact excitation in heavy-particle collisions, classical trajectory Monte Carlo method, strong magnetic field, state-selective cross-section

PACS: 34.50.Fa, 34.50.-s

DOI: 10.7498/aps.62.073401

* Project supported by NSAF (Grant No. 10976016), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11025417, 10974021, 10979007, 11104017).

† Corresponding author. E-mail: hebin-rc@163.com